

В. Л. Поляков

К расчету неустановившегося биофильтрации*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. Я. Олейником)*

Сформульовано задачу неусталеного біофільтрування води з невисоким вмістом органічних сполук при лімітованому зростанні біомаси. Одержано її строгий розв'язок і на його основі запропоновано для практики ряд розрахункових формул. На багаточисленних прикладах виконано кількісний аналіз зміни з часом і за висотою завантаження концентрацій субстрату і біомаси, часу початку його повноцінної захисної дії.

Работа затопленных биореакторов-фильтров осуществляется последовательно в двух режимах. Первый, переходный, сравнительно быстро сменяется основным, который реализуется в течение длительного времени и обеспечивает стабильное снижение содержания растворенных органических соединений (субстрата) в природных, сточных водах до требуемого уровня. Поэтому второй режим имеет устойчивые показатели и надежно описывается стационарными математическими моделями [1–4]. Окисление субстрата главным образом происходит в образовавшихся и закрепившихся на элементах пористой загрузки (зернах) биопленках (микроорганизмы и продукты их жизнедеятельности). Известные структурные модели биопленки позволяют с высокой достоверностью установить обобщенную функцию утилизации субстрата, необходимую для теоретических исследований поведения субстрата уже на макроуровне, т. е. в пределах объема фильтра. Именно на базе подобной двухуровневой модели анализировалось аналитическими методами установившееся биофильтрация [5, 6]. Вместе с тем большую ценность для практики представляет прогноз момента времени, начиная с которого качество фильтрата отвечает принятым нормативам. Аккуратно определять этот момент можно, только основываясь на нестационарной модели биофильтрации. Ключевую роль в такой модели играет вышеупомянутая функция, связывающая интенсивность деградации субстрата R с концентрациями его (S_w) и биомассы (B). Традиционно для трансформационных процессов микробиологической природы данная функция имеет форму

$$R = \frac{\lambda S_w}{S_w + K} \frac{B}{Y}, \quad (1)$$

где λ — удельная максимальная скорость роста биомассы; K — константа полунасыщения; Y — экономический коэффициент трансформации субстрата в биомассу. Правомочность использования выражения (1) обоснована в многочисленных работах, например [7–10]. Тогда после принятия обычной для подобных задач системы допущений [6, 11] исходная модель включает следующие уравнения баланса субстрата, биомассы, граничное и начальное условия:

$$V \frac{\partial S_w}{\partial z} + \frac{\lambda S_w}{S_w + K_w} \frac{B}{Y} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \frac{\lambda S_w}{S_w + K_w} B - k_d B, \quad (3)$$

$$z = 0, \quad S_w = S_0; \quad t = 0, \quad B = B^0. \quad (4)$$

Здесь V — скорость фильтрования; k_d — коэффициент скорости отрыва биомассы; S_0 — исходная концентрация субстрата. Проблематичным является выбор начального значения B^0 концентрации B , которое зависит от происхождения первоначальной биомассы (сохранилась с предыдущего фильтроцикла, введена определенной дозой в начале рассматриваемого фильтроцикла). Однако с течением времени этот фактор становится малосущественным.

При решении задачи (2)–(4), прежде всего, концентрация B выражается, исходя из (2), через S_w следующим образом:

$$B = -\frac{VY}{\lambda} \frac{\partial u}{\partial z}, \quad (5)$$

где

$$u = \int \frac{S_w + K_w}{S_w} dS_w = S_w + K_w \ln S_w.$$

Подстановка выражения (5) в (3) дает

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -\frac{VY}{\lambda} \frac{(\lambda - k_d)S_w - k_d K_w}{S_w + K_w} \frac{\partial u}{\partial z}. \quad (6)$$

Отсюда с учетом (5) следует

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u(S_w)}{\partial t} \right) = \frac{\partial U(S_w)}{\partial z}, \quad (7)$$

где $U = (\lambda - k_d)S_w - k_d K_w \ln S_w$. В результате интегрирования уравнения (7) при граничном условии (4) получено

$$\frac{\partial u}{\partial t} = U(S_w) - U(S_0). \quad (8)$$

Связь между S_w , z и t устанавливается путем интегрирования уравнения (8)

$$t + C(z) = \int \frac{(S_w + K_w)dS_w}{S_w[(\lambda - k_d)(S_w - S_0) - k_d K_w \ln S_w/S_0]}. \quad (9)$$

Вследствие пренебрежения локальной производной $\partial S_w/\partial t$ в уравнении массопереноса начальная концентрация субстрата S^0 становится функцией от z , которую следует определять в ходе решения поставленной задачи. Искомая же зависимость S_w от z , t после выражения C через S^0 представится в неявной форме

$$t = \int_{S^0(z)}^{S_w} \frac{(\xi + K_w)d\xi}{\xi[(\lambda - k_d)(\xi - S_0) - k_d K_w \ln \xi/S_0]}. \quad (10)$$

Путем дифференцирования (10) по z с учетом (5) выводится уравнение

$$\begin{aligned} & \frac{(S^0 + K_w)}{S^0[(\lambda - k_d)(S^0 - S_0) - k_d K_w \ln S^0/S_0]} \frac{dS^0}{dz} + \\ & + \frac{\lambda B}{VY[(\lambda - k_d)(S_w - S_0) - k_d K_w \ln S_w/S_0]} = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

В (11) полагается $t = 0$ и тогда задачу относительно $S^0(z)$, принимая во внимание начальное условие (4), запишем так:

$$\frac{dS^0}{dz} + \frac{\lambda B^0}{VY} \frac{S^0}{S^0 + K_w} = 0; \quad z = 0, \quad S^0 = S_0. \quad (12)$$

Решение задачи (12) имеет вид

$$z = -\frac{VY}{\lambda B^0} \left(S^0 - S_0 + K_w \ln \frac{S^0}{S_0} \right). \quad (13)$$

Выражение для искомой функции-концентрации $B(z, t)$ вытекает из (11) и с учетом уравнения (12) принимает такую форму:

$$B = B^0 \frac{(\lambda - k_d)(S_w - S_0) - k_d K_s \ln S_w/S_0}{(\lambda - k_d)(S^0 - S_0) - k_d K_s \ln S^0/S_0}. \quad (14)$$

Путем предельного перехода $z \rightarrow 0$, $S_w \rightarrow S^0$ в (10) и с учетом выражений для производных $\partial S_w/\partial z$, $\partial S^0/\partial z$, согласно (2), (12), выведена простая формула для концентрации биомассы на входе в загрузку со временем

$$B_0(t) = B(0, t) = B^0 \exp\left(\frac{(\lambda - k_d)S_0 - k_d K_w t}{S_0 + K_w}\right).$$

Отсюда очевидно, что прирост биомассы в загрузке невозможен, если

$$(\lambda - k_d)S_0 \leq k_d K_w.$$

Для вычисления потерь напора в загрузке прежде всего необходимо задаться эмпирической зависимостью коэффициента фильтрации k от концентрации B , которая в общем виде будет такой [12, 13]:

$$k = k_0 f(B). \quad (15)$$

Искомые потери при $V = \text{const}$ находятся из решения фильтрационной задачи

$$V = -k_0 f(B) \frac{\partial h}{\partial z}; \quad z = L, \quad h = H_d, \quad (16)$$

где h — напор в загрузке; L — высота загрузки; H_d — выходной напор. В результате они составляют

$$\Delta h(t) = \frac{V}{k_0} \int_0^L \frac{dz}{f(B(z, t))}. \quad (17)$$

Из построенного выше решения вытекают известные расчетные формулы для ряда частных случаев. Так, при $S_w \geq K_w$ (реакция нулевого порядка) формулы для концентраций S_w представим таким образом:

$$S_w = S_0 - \frac{\lambda B^0}{VY} z e^{(\lambda - k_d)t}, \quad (18)$$

$$B = B^0 e^{(\lambda - k_d)t}. \quad (19)$$

Если же концентрация S_w очень низкая ($S_w \ll K_w$, реакция первого порядка), то соответствующие формулы примут вид

$$S_w = \frac{S_0}{1 - e^{-\frac{\lambda S_0 t}{K_w}} + e^{-\frac{\lambda}{K_w} \left(S_0 t + \frac{B^0 z}{VY} \right)}}, \quad (20)$$

$$B = \frac{B^0}{1 - e^{-\frac{\lambda B^0 z}{VY K_w}} + e^{-\frac{\lambda}{K_w} \left(S_0 t + \frac{B^0 z}{VY} \right)}}. \quad (21)$$

Наконец, если пренебречь явлением отрыва биомассы ($k_d = 0$), то

$$t = \frac{1}{\lambda} \left(\ln \frac{S_w}{S^0} + \frac{K_w}{S_0} \ln \frac{S^0(S_0 - S_w)}{S_w(S_0 - S^0)} \right), \quad (22)$$

$$B = B^0 \frac{S_w - S_0}{S^0 - S_0}. \quad (23)$$

Расчетные формулы заметно упрощаются, если ввести безразмерные переменные и параметры таким образом: $\bar{S}_w = S_w/S_0$, $\bar{B} = B/B^0$, $\bar{z} = z/L$, $\bar{t} = \lambda t$, $\bar{K}_w = K_w/S_0$, $\bar{k}_d = k_d/\lambda$, $\sigma = \lambda L B^0 / (VY S_0)$, $\Delta \bar{h} = (h - H_d)/\Delta h^0$, Δh^0 — потери напора в чистой загрузке. Тогда получаем

$$\bar{K}_w \ln \bar{S}^0 + \bar{S}^0 = 1 - \sigma \bar{z}, \quad (24)$$

$$\bar{t} = \int_{\bar{S}_w}^{\bar{S}^0(z)} \frac{(\xi + \bar{K}_w) d\xi}{\xi [(1 - \bar{k}_d)(1 - \xi) + \bar{k}_d \bar{K}_w \ln \xi]}, \quad (25)$$

$$\bar{B} = \frac{(1 - \bar{k}_d)(1 - \bar{S}_w) + \bar{k}_d \bar{K}_w \ln \bar{S}_w}{(1 - \bar{k}_d)(1 - \bar{S}^0) + \bar{k}_d \bar{K}_w \ln \bar{S}^0}, \quad (26)$$

$$\bar{B}_0 = \exp \left(\frac{1 - \bar{k}_d - \bar{k}_d \bar{K}_w \bar{t}}{1 + \bar{K}_w} \right), \quad (27)$$

$$\Delta \bar{h}(\bar{t}) = \frac{1}{\sigma} \int_{\bar{S}_e}^1 \frac{(\xi + \bar{K}_w) d\xi}{\xi \bar{B}(\xi, \bar{S}^0) f(\bar{B}(\xi, \bar{S}^0))}. \quad (28)$$

Из (26) вытекает важное следствие, а именно, уравнение относительно безразмерной установившейся выходной концентрации $\bar{S}_{e\infty} = \bar{S}_w(1, \infty)$

$$\bar{S}_{e\infty} - \frac{\bar{k}_d \bar{K}_w}{1 - \bar{k}_d} \ln \bar{S}_{e\infty} = 1. \quad (29)$$

В начальный период работы фильтр не в состоянии обеспечить надлежащее качество фильтрата из-за недостаточного развития в нем биоценоза. Поэтому его защитное действие полноценно реализуется лишь с некоторого момента времени t_p . Кстати, в специальной

литературе по вопросам фильтрации суспензий t_p характеризует длительность такого действия загрузки, так что с этого момента ее необходимо регенерировать. В рассматриваемой же ситуации, наоборот, к моменту t_p выходная концентрация субстрата снижается до предельно допустимой в соответствии с существующими нормативами уровня органического загрязнения S_* . Рассчитывается относительное значение \bar{t}_p в два этапа: сначала из (25) вычисляется величина $\bar{S}_e^0 = \bar{S}^0(1)$, а затем и искомое время по формуле

$$\bar{t}_p = \int_{\bar{S}_e^0}^{\bar{S}_*} \frac{(\xi + \bar{K}_w)d\xi}{\xi[U(\xi) - U(1)]}. \quad (30)$$

Для иллюстрации построенного выше точного решения нестационарной задачи биофильтрации, а также оценки значимости используемых в исходной математической модели параметров выполнен разнообразный количественный анализ. Основывается он на четырех примерах с типичными исходными данными. Так, в базовом, первом примере приняты $\sigma = 0,001$, $\bar{k}_d = 0,5$, $\bar{K}_w = 0,5$; в других примерах поочередно изменяются значения σ (0,01, второй пример); \bar{k}_d (0,25, третий); \bar{k}_d и \bar{K}_w (0,25 и 1, четвертый). Предметом расчетов стали относительные характеристики — концентрации субстрата, биомассы и время начала эффективной работы фильтра. Длительность расчетных периодов выбрана настолько большой, что биомасса успевает увеличиться на 3–4 порядка. Подобная ситуация обычно складывается при инокуляции малого количества деятельных микроорганизмов в биореактор-фильтр с первоначально чистой загрузкой. Очевидно, что развитие биомассы в нем ограничено размерами порового пространства. В действительности же при постоянной скорости фильтрации ее накопление прекращается намного раньше, чем будет заполнено поровое пространство, из-за снижения прочности биопленок на элементах среды и усиления воздействия на них фильтрационного потока. Поэтому у концентрации B существует предельная величина B_{\max} , которая зависит от физико-химических свойств пористой среды, органического загрязнителя и гидродинамических условий. Кстати, если значение B_{\max} заранее известно, то его удобно задействовать в качестве масштаба для концентрации B и тогда ее безразмерный аналог \bar{B} будет изменяться в пределах от очень малого начального значения \bar{B}^0 до 1. Относительное время \bar{t}_{\max} , за которое величина \bar{B} достигает максимума, легко вычисляется по формуле, вытекающей из (28),

$$\bar{t}_{\max} = \frac{1 + \bar{K}_w}{1 - \bar{k}_d - \bar{k}_d \bar{K}_w} \ln \bar{B}_{\max}.$$

Произойдет это во входном сечении загрузки, где всегда аккумулируется наибольшее количество биомассы. И для последующего прогноза принятую модель, строго говоря, следует корректировать. Для этого вводится подвижная граница, на которой имеет место постоянная концентрация \bar{B}_{\max} . Впрочем в первом приближении отмеченное обстоятельство можно проигнорировать, что приведет, конечно, к постепенно нарастающей погрешности в вычислениях, особенно, потерь напора.

Прежде всего, рассчитано изменение выходной концентрации субстрата, являющейся важнейшим показателем качества водоочистки. Соответствующие четырем примерам кривые $\bar{S}_e(\bar{t})$ изображены на рис. 1. Как свидетельствует расположение кривых 1–3 относительно 4, указанные выше изменения параметров \bar{k}_d , \bar{K}_w , σ могут существенно сказаться

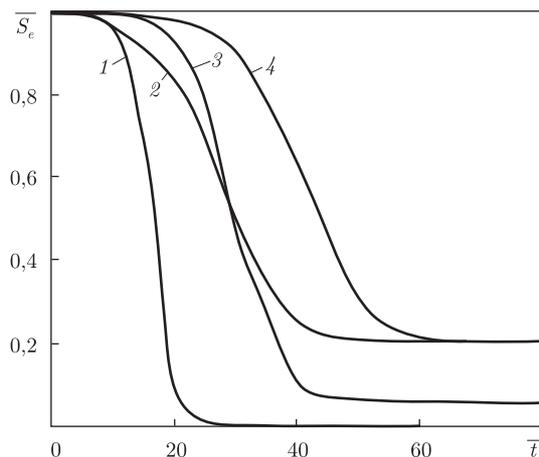


Рис. 1. Изменение относительной выходной концентрации субстрата со временем: 1 — пример 3; 2 — пример 2; 3 — пример 4; 4 — пример 1

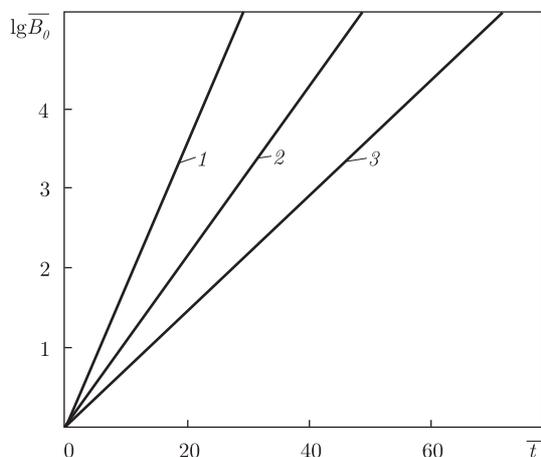


Рис. 2. Изменение относительной концентрации биомассы на входе в загрузку со временем: 1 — пример 3; 2 — пример 4; 3 — пример 1

на содержании субстрата в фильтрате. Наиболее значимым оказывается параметр, характеризующий явление мобилизации биомассы, поскольку уменьшение базового значения \bar{k}_d вдвое ведет к резкому повышению эффективности действия фильтра. Аналогичное же увеличение \bar{K}_w имеет обратный, но не столь сильно выраженный эффект. Наконец, увеличение на порядок параметра σ , а по сути — исходного содержания биомассы, хотя в меньшей степени, положительно отражается на результатах биофильтрации.

Динамика биомассы в загрузке имеет сложный характер. С одной стороны, наблюдается монотонный ее рост на входе до момента \bar{t}_{\max} , что подтверждается результатами вычислений \bar{B}_0 по формуле (28), представленными в форме графиков зависимости $\lg \bar{B}_0(\bar{t})$ на рис. 2. Естественно, что быстрее накапливается биомасса при меньших значениях \bar{k}_d , \bar{K}_w . Увеличение интенсивности отрыва и уменьшение скорости утилизации субстрата за счет принятия большего значения \bar{K}_w ощутимо тормозит здесь аккумуляцию биомассы. Иная ситуация, как видно из рис. 3, складывается в нижней части загрузки (нисходящее фильтрование). На нем показаны профили концентрации $\bar{B}(\bar{z})$, определенные для данных примера 1 на три

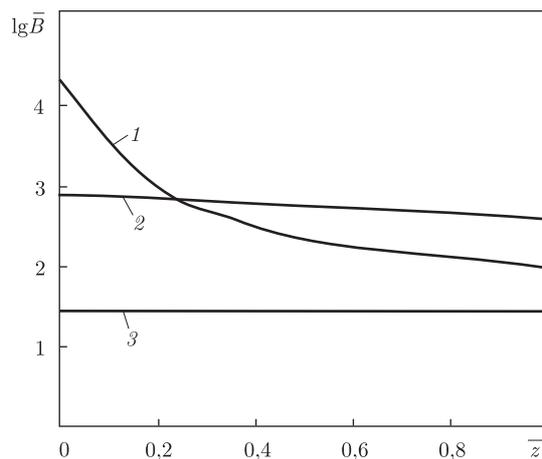


Рис. 3. Распределение относительной концентрации биомассы по высоте загрузки: 1 – $\bar{t} = 60$; 2 – $\bar{t} = 40$; 3 – $\bar{t} = 20$

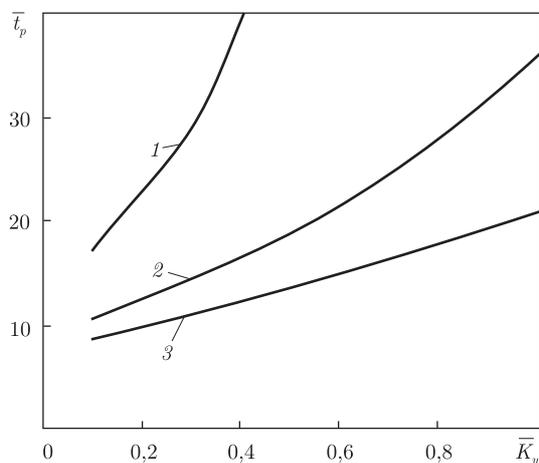


Рис. 4. Графики зависимости $\bar{t}_p(\bar{K}_w)$: 1 – $\bar{k}_d = 0,5$; 2 – $\bar{k}_d = 0,25$; 3 – $\bar{k}_d = 0,1$

разных момента времени. Эти моменты отвечают трем стадиям переходного режима биофильтрации. И если на ранних стадиях (кривые 2, 3) распределение биомассы по высоте относительно равномерное, то на поздней стадии оно становится существенно неравномерным (кривая 1). С точки зрения расчетов работы и параметров фильтра, важно знать, на какой из выделенных стадий находится процесс биофильтрации в момент \bar{t}_{\max} . В случае первых двух стадий исходная модель вообще не нуждается в коррекции, что касается третьей, то уточнение модели и расчетов становится целесообразным. В целом сначала содержание биомассы внизу загрузки растет так же, как и вверху. Однако затем биопленки на ее верхнем участке настолько развиваются, что начинают потреблять основную часть субстрата. Вследствие этого ограничивается рост биомассы на нижнем участке, ведущую роль в ее балансе уже играет отрыв и, как следствие, величина \bar{B} неуклонно снижается.

В заключение по формулам (25), (29) рассчитывалось относительное время начала защитного действия загрузки на требуемом уровне в зависимости от константы \bar{K}_w , которая изменялась в пределах от 0,1 до 1. При этом варьировались значения \bar{k}_d (0,1; 0,25; 0,5)

и требовалось, чтобы содержание загрязнения в воде в результате фильтрования снизилось в пять раз ($\bar{S}_* = 0,2$). Соответствующие кривые $\bar{t}_p(\bar{K}_w)$ изображены на рис. 4 и свидетельствуют о сильном влиянии явления отрыва биомассы на расчетный параметр. Особенно резко растет \bar{t}_p с увеличением \bar{K}_w при $\bar{k}_d = 0,5$, а при $\bar{K}_w \geq 1$, согласно (28), концентрация B не в состоянии превысить даже исходный уровень.

1. Hozalski R. M., Bower E. J. Non-steady state simulation of BOM removal in drinking water biofilters: applications and full-scale validation // Water Res. – 2001. – **35**, No 1. – P. 211–223.
2. Rittmann B. E., Brunner C. W. The nonsteady-state-biofilm process for advanced organics removal // J. Water Pollut. Control. Fed. – 1984. – **56** (7). – P. 874–880.
3. Spigno G., Zilli M., Micoletta C. Mathematical modeling and simulation of phenol degradation in biofilters // Biochem. Eng. J. – 2004. – **19**. – P. 267–275.
4. Viotti P., Eramo B., Boni M. R. et al. Development and calibration of a mathematical model for the simulation on the biofiltration process // Advances in Environ. Res. – 2002. – **7**. – P. 11–33.
5. Поляков В. Л. Моделирование биофильтрования воды с ограниченным содержанием органического субстрата. Аэробная биопленка // Доп. НАН України. – 2011. – № 5. – С. 72–77.
6. Поляков В. Л. Моделирование биофильтрования воды с ограниченным содержанием органического субстрата. Биореактор-фильтр // Там само. – 2011. – № 7. – С. 58–66.
7. Atkinson B., Davies F. J. The overall rate of substrate uptake (reaction) by microbial films. A biological rate equation // Trans Inst. Chem. Eng. – 1974. – **52**. – P. 248–259.
8. Baveye P., Valocchi A. J. An evaluation of mathematical models of the transport of biologically reacting solutes in saturated soils and aquifers // Water Resour. Res. – 1989. – **25**. – P. 1413–1421.
9. Krailas S., Pham Q. T. Macrokinetic determination and water movement in a downward flow biofilter for methanol removal // Biochem. Eng. J. – 2002. – **10**. – P. 103–113.
10. Suidan M. T., Rittmann B. E., Traeger U. K. Criteria establishing biofilm-kinetic types // Water. Res. – 1987. – **21**. – P. 491–498.
11. Олійник О. Я., Рибаченко С. О. Теоретичний аналіз процесів доочистки стічних вод // Доп. НАН України. – 2008. – № 3. – С. 6–63.
12. Cunningham A. B., Characklis W. G., Abedeen F., Crawford D. Influence of biofilm accumulation on porous media hydrodynamics // Environ. Sci. Technol. – 1991. – **38**. – P. 1305–1311.
13. Vancole A., Brissaud F., Gnagne T. Oxidation processes and clogging in intermittent unsaturated infiltration // Water Sci. Tech. – 2003. – **48**, No 11–12. – P. 139–148.

Институт гидромеханики НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 25.11.2010

V. L. Polyakov

On the calculation of non-steady biofiltration

A task of nonsteady-state biofiltration of water with low-content organic compounds when the biomass growth is limited has been formulated. An exact solution to the task has been obtained, and a number of calculation formulae has been proposed to use in practice. At numerous examples, a quantitative analysis of substrate and biomass concentrations changing in time and along the filter medium height, as well as the time of the filter protection action, has been performed.